〔格子場内の一電子波動函数（Ｉ）〕への補足

広　田　　　徹（芝浦工大）

（１２月２日受理）

§１　序

今年の物性研究６月号に発表した「表題の論文[1]の後半に於て、一次元格子場内の一電子波動函数を、Fredholm 型積分方程式の interaction 級数を用いて論じたが、周期格子の取扱いに少々無理があつたように思われる。そこで、この論文補足に於て有限区間内のFredholm型積分方程式の interaction を一次元の周期格子に限つて厳密に取扱い、級数を完全に sum up する。その結果 volterra 型積分方程式の場合と同様な process で Bloch wave が生ずることがわかる。又 sum up の process は平面波が格子ポテンシヤルにより多重散乱を受け、その結果として Bloch mode という一つの新しい状態が生み出されることを示すものである。

§２　iteration 級数及び summing プロセス

一次元ポテンシヤル $V(x)$ の場内に於ける一電子波動函数に対する Fredholm の積分方程式は

$$\psi(x)=\psi_0(x)+\int_0^L \frac{1}{2k}\sin k\,|x-\xi|\,V(\xi)\,\psi(\xi)\,d\xi \tag{1}$$

と書ける。$\psi_0(x)$ は $V=0$ の時の解であり

$$\psi_0(\lambda)=A\cos kx+B\sin kx \tag{2}$$

を表わす。$\frac{1}{2k}\sin k\,|x-\xi|$ は定常波を作るグリーン函数[2]である。

interaction により

$$\psi(x)=\psi_0(x)+\sum_{n=1}^{\infty}\int_0^L\cdots\int_0^L d\xi_1\cdots d\xi_n\,\frac{1}{2k}\sin k\,|x-\xi_1|\,V(\xi)\,\frac{1}{2k}\sin k\,|\xi_1-\xi_2|$$

$$\times V(\xi_1)\cdots\cdots\frac{1}{2k}\sin k\,|\xi_{n-1}-\xi_n|\,V(\xi_n)\,\psi_0(\xi_n) \tag{3}$$

ここで絶対値を次のように処理する。

$$\int_0^L \int_0^L \sin k\,|\xi_{i-1} - \xi_i|\,V(\xi_i) \sin k\,|\xi_i - \xi_{i+1}|\,V(\xi_{i+1})\,d\xi_i d\xi_{i+1} \tag{4}$$

$$= \left(\int_0^{\xi_{i-1}} - \int_{\xi_{i-1}}^{L}\right) d\xi_i \sin k(\xi_{i-1} - \xi_i) V(\xi_i) \left(\int_0^{\xi_i} - \int_{\xi_i}^{L}\right) d\xi_{i+1} \sin k(\xi_i - \xi_{i+1}) V(\xi_{i+1})$$

$$= \left(2\int_0^{\xi_{i-1}} - \int_0^{L}\right) d\xi_i \sin k(\xi_{i-1} - \xi_i) V(\xi_i) \left(2\int_0^{\xi_i} - \int_0^{L}\right) d\xi_{i+1} \sin k(\xi_i - \xi_{i+1}) V(\xi_{i+1})$$

記号的に

$$2\int_0^{\xi_{i-1}} d\xi_i = P, \quad -\int_0^{L} d\xi_i = Q \tag{5}$$

と書くと iteration の n 次の項は

$$(P+Q)^n = PP\cdots\cdots P + PP\cdots Q\cdots P + \cdots$$
$$\cdots + QQ\cdots PQ + QQ\cdots Q \tag{6}$$

の形になる。Pは次の座標が入つているから chain（積分）を作るがQは0から L 迄の積分であるから chain を切ることになる。n は∞迄走るのであるから(6)の形の級数を直接計算しなくても次のようにして iteration 級数を取扱える。

先ずQの個数を決め、その間にPが入るすべての可能性を考える。

… P P　Q　PP　Q　P P P　Q　P　Q　P　Q　Q …

Fig. 1

すると各Qの区間に入るPの個数は0から∞迄とることができる。故に積分乃至和はQを境として各区間に分けることができる。次いで

$$\int_0^L \sin k(\xi_i - \xi_{i-1}) V(\xi_{i-1})\,d\xi_{i-1} \sin \cdots\cdots$$

$$=\sin k\xi_i\int_0^L \cos k\xi_{i-1}V(\xi_{i-1})d\xi_{i-1}\sin k(\xi_{i-1}-\xi_{i-2})\cdots \tag{7}$$

$$-\cos k\xi_i\int_0^L \sin k\xi_{i-1}V(\xi_{i-1})d\xi_{i-1}\sin k(\xi_{i-1}-\xi_{i-2})\cdots$$

に注意すると iteration の級数は次のマトリックス及びベクトルにより

$$\psi(x)=\sum_{n=0}^{\infty}(-1)^n\,\overline{I}(x,o)M^n\underline{I} \tag{8}$$

と書ける。(n は Q の個数を示すことに注意する)

但

$$M=\begin{matrix} M_{cs}, & M_{cc} \\ M_{ss}, & M_{sc}\end{matrix} \qquad \overline{I}=(I_s,\ I_c) \qquad \underline{I}=\begin{pmatrix}B\\A\end{pmatrix} \tag{9}$$

$$M_{cs}=\sum_{n=1}^{\infty}2^{n-1}\int_0^L d\xi_1\cos k\xi_1 V(\xi_1)\frac{1}{2k}\sin k(\xi_1-\xi_2)\int_0^{\xi_1}d\xi_2\frac{1}{2k}\sin k\cdots$$

$$\cdots\cdots\int_0^{\xi_{n-1}}d\xi_n\frac{1}{2k}\sin k(\xi_{n-1}-\xi_n)\sin k\xi_n \tag{10}$$

$$M_{cc}=\sum_{n=1}^{\infty}2^{n-1}\int_0^L d\xi_1\cos k\xi_1 V(\xi_1)\frac{1}{2k}\sin k(\xi_1-\xi_2)\int_0^{\xi_1}d\xi_2\frac{1}{2k}\sin k\cdots$$

$$\cdots\cdots\int_0^{\xi_{n-1}}d\xi_n\frac{1}{2k}\sin k(\xi_{n-1}-\xi_n)\cos k\xi_n$$

$M_{ss}M_{sc}$ も同様に定義される。但し前に負の符号がつく。又

$$I_s=\sum_{n=0}^{\infty}2^n\int_0^x d\xi_1\frac{1}{2k}\sin k(x-\xi_1)V(\xi_1)\int_0^{\xi_1}d\xi_1\frac{1}{2k}\sin k(\xi_1-\xi_2)V(\xi_2)$$

$$\cdots\cdots\int_0^{\xi_{n-1}}d\xi_n\frac{1}{2k}\sin k(\xi_{n-1}-\xi_n)\sin k\xi_n$$

(11)

$$I_c=\sum_{n=0}^{\infty}2^n\int_0^x d\xi_1\frac{1}{2k}\sin k(x-\xi_1)V(\xi_1)\int_0^{\xi_1}\frac{1}{2k}\sin k(\xi_1-\xi_2)V(\xi_2)$$

$$\cdots\cdots\int_0^{\xi_{n-1}}d\xi_n\frac{1}{2k}\sin k(\xi_{n-1}-\xi_n)\cos k\xi_n$$

によつて与えられる。I_S I_Cは論文(I)で求めたように波動函数のB，Aの係数である。(Volterra の積分方程式の解)

従つて、周期格子（δ函数ポテンシャル）に対し

$$I_S = \frac{\sin N\alpha a}{\sin \alpha a}\sin ka$$
$$I_C = \left(\frac{\sin (N+1)\alpha a}{\sin \alpha a} - \frac{\sin N\alpha a}{\sin \alpha a}\cos ka\right) \tag{12}$$

αはBloch wave の波数で

$$\cos\alpha a = \cos ka + \frac{\kappa_0}{2k}\sin ka, \quad V(x) = \sum_i \kappa_0 \delta(x - x_i) \tag{13}$$

によつて与えられる。又 $Na = x$ である。

すると

$$M_{CS} = \frac{\kappa_0}{2k}\sum_{N'=0}^{N_0}\cos N'ka\, I_S(N') \qquad 但 \quad N_0 a = L$$
$$M_{SC} = -\frac{\kappa_0}{2k}\sum_{N'=0}^{N_0}\sin N'ka\, I_C(N')$$
$$M_{CC} = \frac{\kappa_0}{2k}\sum_{N'=0}^{N_0}\cos N'ka\, I_C(N') \tag{14}$$
$$M_{SS} = -\frac{\kappa_0}{2k}\sum_{N'=0}^{N_0}\sin N'ka\, I_S(N')$$

の関係があることがすぐわかる。$\overline{I}$ は x 即ち Na に依るけれどもマトリックスM及びベクトル$\underline{I}$ はNには依らないことに注意する。M,$\underline{I}$ は$\overline{I}$ の中の $\sin N\alpha a$, $\cos N\alpha a$ の係数を決める定数であり、系の大きさ（積分範囲），境界条件に依存する。

Mを対角化することにより級数(8)を sum up 出来る。[1] 結果のみを記そう。

マトリックスMの固有値を λ_1, λ_2 とすると

$$\psi(Na) = \frac{1}{\lambda_2 - \lambda_1}\left[\frac{1}{1+\lambda_1}\left(I_3 + \frac{\lambda_1 - M_{CS}}{M_{CC}} I_C\right)\{(\lambda_2 - M_{CS})B - M_{CS} A\}\right.$$

$$+\frac{1}{1+\lambda_2}\left(I_S+\frac{\lambda_2-M_{CS}}{M_{CC}}I_C\right)\{-(\lambda_1-M_{CS})B+M_{CC}A\}]$$

但 $|\lambda_1|,\ |\lambda_2|<1$

$$=\frac{I_S\{M_{CC}A+(1-M_{SC})B\}+I_C\{(1-M_{CS})A+M_{SS}B\}}{1+(M_{CS}+M_{SC})+M_{CS}M_{SC}-M_{CC}M_{SS}} \tag{15}$$

但し M_{CS}, M_{SC}, M_{CC}, M_{SS} は夫々(14)により計算し求めると、Kronig Penny relation (13)の助けをかりて

$$M_{CS}=-\frac{1}{2}+\frac{\kappa_0}{8k}\frac{\sin ka}{\sin\alpha a}\left(\frac{\cos(N_0+\frac{1}{2})(k-\alpha)a}{\sin\frac{k-\alpha}{2}a}-\frac{\cos(N_0+\frac{1}{2})(k+\alpha)a}{\sin\frac{k+\alpha}{2}a}\right)$$

$$M_{SC}=-\frac{1}{2}+\frac{\kappa_0}{8k}\left(\frac{\cos(N_0+\frac{1}{2})(k-\alpha)}{\sin\frac{k-\alpha}{2}a}+\frac{\cos(N_0+\frac{1}{2})(k+\alpha)a}{\sin\frac{k+\alpha}{2}a}\right) \tag{16}$$

$$-\frac{\sin ka}{4\sin\alpha a}\left(\frac{\kappa_0}{2k}\right)^2\left(\frac{\sin(N_0+\frac{1}{2})(k-\alpha)a}{\sin\frac{k-\alpha}{2}a}-\frac{\sin(N_0+\frac{1}{2})(k+\alpha)a}{\sin\frac{k+\alpha}{2}a}\right)$$

$$M_{CC}=\frac{\kappa_0}{8k}\left(\frac{\sin(N_0+\frac{1}{2})(k-\alpha)}{\sin\frac{k-\alpha}{2}a}+\frac{\sin(N_0+\frac{1}{2})(k+\alpha)a}{\sin\frac{k+\alpha}{2}}\right)$$

$$+\frac{\sin ka}{4\sin\alpha a}\left(\frac{\kappa_0}{2k}\right)^2\left(\frac{\cos(N_0+\frac{1}{2})(k-\alpha)a}{\sin\frac{k-\alpha}{2}a}-\frac{\cos(N_0+\frac{1}{2})(k+\alpha)a}{\sin\frac{k+\alpha}{2}a}\right)$$

$$M_{SS}=-\frac{\kappa_0}{8k}\frac{\sin ka}{\sin\alpha a}\left(\frac{\sin(N_0+\frac{1}{2})(k-\alpha)a}{\sin\frac{k-\alpha}{2}a}-\frac{\sin(N_0+\frac{1}{2})(k+\alpha)a}{\sin\frac{k+\alpha}{2}a}\right)$$

となる。これらは定数である。A，Bのとり方により (15)は Bloch wave を表わすことは明らかであろう。

δ函数ポテンシャルの場合の結果を出したがsquare well及び一般ポテンシャルの場合も論文(II)[3]の方法に従えば、同様に求めることが出来る。結果は複雑になるだけであるから省略しよう。又このiteration の各項が多

広田　徹

重散乱のプロセスを表わしていることも明らかである。

文　　献

1) T. Hirota　Bussei Kenkyu 2 3 (1964) 119
(private communication)

2) P. Morse, H. Feshbach, Method of Theoretical Physics
p.810, 811

3) T. Hirota　to be published on "the Bussei Kenkyu"
(private communication)